

# Mit dem Computer in die Nanowelt Ab-initio Simulationen von der Biochemie zur Halbleitertechnologie

Blöchl, Peter

Veröffentlicht in:  
Jahrbuch 2004 der Braunschweigischen  
Wissenschaftlichen Gesellschaft, S.59-60



J. Cramer Verlag, Braunschweig

## **Mit dem Computer in die Nanowelt Ab-initio Simulationen von der Biochemie zur Halbleitertechnologie\***

PETER BLÖCHL

Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Clausthal  
<http://www.pt.tu-clausthal.de/abt/>  
Nieper-Straße 14, D-38640 Goslar

Die Längenskala, in der vom Menschen gezielt manipuliert werden kann, reicht etwa von Mikrometern bis hin zu einigen Kilometern. An die Mikrometerskala schließt sich bis hinunter zu atomaren Abständen (etwa 0.1 Nanometern) das Gebiet der Nanotechnologie an, das derzeit intensiv erschlossen wird. Während die klassische Physik ausreicht, um die meisten Phänomene auf größeren Längenskalen zu beschreiben, spielen nicht-klassische, das bedeutet, quantenmechanische Effekte im Nanometerbereich eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Dies führt auf der einen Seite zu allerhand Überraschungen und Schwierigkeiten, eröffnet auf der anderen Seite aber auch vollkommen neue Möglichkeiten. Allerdings sind die experimentellen Techniken auf der Nanometerskala stark eingeschränkt. Bei Prozessen in diesem Bereich, die experimentell nur unvollständig erfasst werden können, spielen ab-initio Simulationen eine wichtige Rolle. Ab-initio heisst hierbei, dass man allein von physikalischen Grundgesetzen ausgeht ohne auf experimentelle Parameter zurückzugreifen.

Es werden drei Beispiele von ab-initio Simulationen vorgestellt:

- Das Enzym Nitrogenase bringt Stickstoff aus der Luft in eine Form, die von den Zellen für den Aufbau biologischer Materie verwendet werden kann. Dies ist eine große Herausforderung, die nur von einigen Bakterienarten bewältigt wird, weil Luftstickstoff extrem unreaktiv ist. Die Natur verwendet hierzu eines der komplexesten bioanorganischen Enzyme, dessen Funktionsweise bisher verborgen blieb. Mit Hilfe von ab-initio Simulationen [1, 2] war es möglich, den chemischen Prozess Schritt für Schritt zu ergründen.
- Enantioselektive Katalyse ist ein modernes Forschungsgebiet, das von großer Bedeutung für die Pharmazeutische Industrie, die Parfümindustrie

---

\* Vortrag gehalten am 10.07.04 vor der Plenarversammlung der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft.

und die Agrartechnologie ist. Es gibt Moleküle, die sich wie linke und rechte Hand unterscheiden. Chemisch sind sie ununterscheidbar. Da biologische Stoffe Moleküle mit einer wohldefinierten Händigkeit aufweisen, differieren ihre biologische Wirkungen enorm. So unterscheiden sich die Geruchsmoleküle von Zitronen und Orangen nur durch ihre Händigkeit. Mit ab-initio Simulationen [3] wurde die Wirkung von Katalysatoren untersucht, welche Reaktionen gezielt steuern, sodass nur Produkte mit einer Händigkeit entstehen. Solche Simulationen geben wichtige Hinweise für das Molecular Engineering neuer Katalysatoren dieser Art.

- Die Halbleiterindustrie lebt von der zunehmenden Miniaturisierung von Halbleiterbauelementen, was sich in größerer Rechengeschwindigkeit, abnehmendem Energieverbrauch und sinkenden Kosten pro Rechenoperation auswirkt. Die kleinsten Strukturen eines Transistors, dem grundlegenden Schaltelement eines Computerchips, messen nur noch wenige Atomabstände. Damit ist die Halbleitertechnologie bereits eine bestehende Nanotechnologie mit enormer wirtschaftlicher Bedeutung. Sie stößt allerdings jetzt an Grenzen, was die Integration neuer Materialien in die bestehende Technologie erfordert. Diese müssen zudem bis auf die atomare Skala kontrolliert hergestellt werden. Ab-initio Simulationen [4, 5, 6] können hierbei Aufschluss über die Wachstumsprozesse dieser Strukturen geben und liefern damit wertvolle Hinweise für die Erforschung neuer Prozesse.

### Referenzen

- [1] KÄSTNER, J. & P.E. BLÖCHL: „Towards an understanding of the workings of nitrogenase: A mechanistic model derived from density functional calculation“, ChemPhysChem. im Druck.
- [2] SCHIMPL, J., H.M. PETRILLI & P.E. BLÖCHL: „Nitrogen Binding to the FeMo cofactor of Nitrogenase“, J. Am. Chem. Soc. 125, 15772-15778 (2003).
- [3] BLÖCHL, P.E. & A. TOGNI: „First-Principles Investigation of Enantioselective Catalysis: Asymmetric Allylic Amination with Pd Complexes Bearing P, N Ligands“, Organometallics 15, 4125 (1996).
- [4] FÖRST, C.J., C.R. ASHMAN, K. SCHWARZ & P.E. BLÖCHL: „The interface between silicon and a high-k oxide“, Nature 427, 53 (2004).
- [5] ASHMAN, C.R., C.J. FÖRST, K. SCHWARZ & P.E. BLÖCHL: „First-Principles Calculations of Strontium on Si (001)“, Phys. Rev. B 69, 75309 (2004).
- [6] ASHMAN, C.R., C. J. FÖRST, K. SCHWARZ & P.E. BLÖCHL: „Chemistry of La on the Si (001) surface from first principles“, Phys. Rev. B. 70, 155330 (2004).